

Становище

от доц. д-р Любомир Николов, ИФХ-БАН
член на Научно жури за защита на дисертационен труд
за получаване на образователната и научна степен „доктор”

Автор на дисертационния труд: Силвия Сталева Цочева,
редовен докторант към катедра “Инженерна химия и фармацевтично инженерство”
при ФХФ-СУ

Тема на дисертационния труд: „Фазово поведение на мастни киселини и алкохоли в
смесени мицеларни разтвори на повърхностно активни вещества”

Направление: 4.2 Химически науки (Теоретична химия – Макрокинетика)

Целите поставени в дисертацията са свързани с изследването и решаването на особено важните за физикохимията на мицелите проблеми като определяне на границите на разтворимост на мастни киселини и алкохоли в мицеларни разтвори на различни видове повърхностно активните вещества (ПАВ), както и построяването на фазовите диаграми на смесените мицели от тези вещества.

Границите на разтворимостта са експериментално измерени и получени за различни дължини на въглеродородната верига на мастните киселини и основи, при различни концентрации и на двата типа ПАВ, както и за няколко различни температури. Въз основа на оригинално създаден теоретичен модел са интерпретирани резултатите от разтворимостта и са пресметнати важни величини като параметъра на взаимодействие на двете компоненти в смесения мицел - ПАВ и киселина/алкохол, енергията за пренос на една молекула киселина/алкохол от средата в смесения мицел и накрая са изведени и построени фазовите диаграми. Също така, теорията за фазовите диаграми, която се отнася за нейонни и цвистерйонни ПАВ, е доразвита и за йонни ПАВ с отчитане на електростатичните взаимодействия в разтворите.

Актуалността на проблемите в дисертационния труд в научно и особено в приложно отношение е безспорна. Трябва да се отбележи интересът на световно известната фирма Unilever към смеси от ПАВ, изследвани в дисертацията за многобройни приложения в практиката. Освен това, резултатите могат да се използват и за теоретично моделиране на други експериментални данни и дори за предсказване на фазовото поведение за други мастни киселини и/или основи с въглеродородни вериги с подобни на изследваните в дисертацията дължини.

Имам следните забележки към написаното в дисертацията:

1. Недобър стил в изложението. Останах с впечатлението, че като че ли втората и трета глави от дисертацията са писани от различни хора. Въпреки че самия докторант пише на стр. 10 в Увода „...Глави 2 и 3 на практика представляват директен превод на статиите [Д1] и [Д2]...”, по изложението в дисертацията би трябвало да се положат **повечко** усилия – например в изчистване на глаголните времена, отстраняване на печатните грешки, появата на запетайки, разположение на фигури и таблици и т.н.

Освен това, добре би било след завършването на всеки параграф/дял от всяка глава да се изтъква и личния принос на докторанта. В стремежа да се опише по-добре и по-подробно, особено логиката и механизма на пресмятанията, се усеща неяснота и дори на моменти, липсата на този принос.

2. Част от фигурите в дисертацията се намират твърде далече от мястото на първото им цитиране. Фрапиращ е случая с Фиг. 3.10 на стр. 88, чиято първа част (Фиг. 3.10 а) е представена стр. 86 и дискутирана на стр. 89; представянето, обаче на втората и третата ѝ част (Фиг. 3.10 б и Фиг. 3.10 в) се появяват чак на стр. 93, а дискусиата – чак след 8 страници – на стр. 96 и след това. В този случай спокойно можеше тази фигура да се раздели на две отделни фигури – една за единия ПАВ и втора – за другия ПАВ.

3. Скечовите на Фиг. 2.4 и Фиг. 3.9. (за мастни киселини и алкохоли, съответно) би било по-добре да се появяват в началото на изложението на всяка глава, за да може читателя да придобие по-добра представа за изследваните обекти и явления.

4. На много места в глава 2 е използвано означението „... $n=10-18$...”. То би трябвало да се разбира именно като означение, че дължината на въглеродородната верига n е в интервала от 10 до 18, а не като равенство. По същият начин трябва да се интерпретират и „...Наклонът, $|a_1| = 1.30-1.45$ kT, показва енергията, необходима за пренос на една CH_2 група ...” на стр. 37, „...Наклонът, $|k_1| = 1.10-1.25$ kT съответства ...” на стр. 38 – а именно, че наклоните $|a_1|$ и/или $|k_1|$ са в съответните интервали.

5. В глава 2, раздел 2.3.3 на стр. 22 твърдението „...Предвид Ур. (2.2), данните от Фиг. 2.3 показват, че $y_{A,sat}$ не зависи от концентрацията на ПАВ, C_S” е грешно, тъй като по дефиниция (виж ур. (2.1)) $y_{A,sat}$ зависи от C_S . В случая вместо $y_{A,sat}$, трябва да се разбира A_{sat} – наклона на линейната зависимост между концентрацията на мастна киселина при насищане $C_{A,sat}$ от C_S , както това е правилно описано в съответната част на Глава 3 за мастни алкохоли (стр. 67, първи параграф отгоре).

6. Липсват данни и/или дори коментар (бегло споменаване) за грешката/те в експерименталните данни. Например за експерименталните данни, представени на Фиг. 2.10 (Зависимостта на рН от концентрацията C_A при различни концентрации на SLES. Между другото не става ясно защо подобна зависимост не е експериментално проверена и за другото ПАВ?) е разумно да се предположи, че грешката по ординатата (рН) е в рамките на големината на символа, с който е избран да се представят стойностите на рН. Това, обаче, не е споменато и читателят трябва сам да се досеща. За мен не остана ясно, дали в обяснението за енергията за солубилизация $-\ln K_{A,mic}$ (стандартната енергия за пренос на молекула мастна киселина/алкохол от водната фаза към мицеларната) на стр. 39 и данните, показани на Фиг. 2.8 и в Таблица 2.5, цитирам: „...интересно е да се отбележи, че наклонът на зависимостите, $|k_1|$, който изразява енергията за пренос на една CH_2 група, намалява с нарастване на T за SLES, но нараства за САРВ...”, разликата в поведението на този наклон с температурата за двете различни ПАВ не е в рамките на грешката? По-нататък, ако това е така, логично следва да се постави въпроса дали пък поведението на параметъра $|k_1|$ с температурата може да едно и също с T – намалява с повишаване на температурата и за двете ПАВ, независимо от това дали смесените мицели се образуват с мастни киселини или с мастни алкохоли (виж стр. 84 първи параграф, Фиг. 3.8 и Таблица 3.5.)? Последното твърдение, като че ли е по-физически издържано, отколкото твърдението, че **само** в случая на мастни киселини зависимостта на енергията за солубилизация от температурата е различна за двата вида ПАВ.

С изключение на споменатите забележки и въпроси, нямам никакви възражения по същество.

Дисертацията се основава на две публикации. Те са в престижното международно научно списание, реферирано и индексирани в световната система за рефериране, индексирани и оценяване - *J. Colloid Interface Sci.* Първата статия, публикувана през 2012 има 8 цитата и 5 самоцитата, но по отношение само на американския съавтор К. Р. Ananthapadmanabhan. За втората статия, публикувана в същото списание, но през 2014 засега не са забелязани цитати.

Получените резултати са представяни като 4 устни доклада (2 са изнесени лично от докторанта) и 4 постера на различни международни и национални научни форуми. Не познавам лично г-жа Цочева, но от предоставените материали по защитата може обосновано да се твърди, че приносите в дисертационния труд са в значителна степен нейно лично дело.

Въз основа на гореизложеното считам, че предложеният дисертационен труд удовлетворява всички изискванията на ЗРАСРБ и на Препоръките за критериите при придобиване на научни степени и заемане на академични длъжности в СУ за професионално направление 4.2. „Химически науки”. Ето защо, препоръчвам на Почитаемото Научно жури да присъди на докторанта Силвия Сталева Цочева образователната и научна степен “доктор” в професионално направление 4.2. „Химически науки” (Теоретична химия – Макрокинетика).

23 Март 2015г.

София

доц. д-р Любомир Николов